



Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Задание 2. Численное решение параболического уравнения

Факультет: Вычислительной математики и
кабернетики

Кафедра: Суперкомпьютеров и квантовой
информатики

Группа: М-218

Студент: Иванов Денис Евгеньевич

Предмет: Суперкомпьютерное Моделирование и
Технологии

Москва, 2019

1 Математическая постановка дифференциальной задачи

В двумерной замкнутой области:

$$\Omega = [0 \leq x \leq L_x] \times [0 \leq y \leq L_y] \quad (1)$$

Для $0 < t \leq T$ требуется найти решение $u(x, y, t)$ уравнения в частных производных

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u + \nabla \operatorname{div} u \quad (2)$$

Заметим, что функция u - это вектор функция $u = (u_1, u_2)$ поэтому уравнения (2) можно записать в виде

$$\begin{cases} \frac{\partial u_1}{\partial t} = 2 * \frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} = \frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + 2 * \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial y} \end{cases} \quad (3)$$

Дополним систему (3) начальными условиями

$$u|_{t=0} = \phi(x, y) \quad (4)$$

На границах области заданы граничные условия первого рода, второго рода или периодические

2 Численный метод решения задачи

Для численного решения задачи введем на области Ω равномерную решетку $\Omega_h = \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$, где

$$\begin{aligned}\bar{\omega}_h &= \{u(x_i = ih_x, y_j = jh_y), i, j = 0, 1, \dots, N, h_x N = L_x, h_y N = L_y\} \\ \omega_\tau &= \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, K, \tau K = T\}\end{aligned}\quad (5)$$

ω_h - множество внутренних узлов

ω_γ - множество граничных узлов сетки.

Для аппроксимации исходного уравнения (3) с однородными граничными условиями и начальными условиями (4) воспользуемся следующей системой уравнений

$$\frac{v_{ij}^{n+1} + v_{ij}^n}{\tau} = \Delta^h v^n + \nabla^h \text{div}^h v^n, (x_i, y_j) \in \omega_h, n = 1, 2, \dots, K - 1 \quad (6)$$

Здесь через $v = (v_1, v_2)$ обозначен дискретный аналог дифференциального решения $u = (u_1, u_2)$. А запись v_{ij}^n означает значение численного решения в точке $(x_i, y_j, t_n) \in \bar{\omega}_h \times \omega_\tau$.

Δ^h - пятиточечный разностный аналог оператора Лапласа:

$$\Delta^h v^n = \frac{v_{i-1j}^n - 2v_{ij}^n + v_{i+1j}^n}{h_x^2} + \frac{v_{ij-1}^n - 2v_{ij}^n + v_{ij+1}^n}{h_y^2} \quad (7)$$

$\nabla^h \text{div}^h$ - девятиточечный аналог оператора ∇div :

$$\nabla^h \text{div}^h v^n = \left(\frac{\frac{v_{i-1j}^n - 2v_{ij}^n + v_{i+1j}^n}{h_x^2}}{\frac{v_{ij-1}^n - 2v_{ij}^n + v_{ij+1}^n}{h_y^2}} + \frac{\frac{v_{i+1j+1}^n - v_{i+1j-1}^n - v_{i-1j+1}^n + v_{i-1j-1}^n}{4h_x h_y}}{\frac{v_{i+1j+1}^n - v_{i+1j-1}^n - v_{i-1j+1}^n + v_{i-1j-1}^n}{4h_x h_y}} \right) \quad (8)$$

приведенная выше разностная схема является явной - значение v_{ij}^{n+1} на $(n+1)$ шаге по времени можно явным образом выразить через значения на предыдущих слоях

Для параболических задач такое соотношение имеет вид $\tau < \gamma(h_x^2, h_y^2)$, где γ - константа, которая вычисляется аналитически или подбирается экспериментально.

Для начала счета используем условие (4):

$$v_{ij}^0 = \phi(x_i, y_j), (x_i, y_j) \in \omega_h \quad (9)$$

В случае однородных граничных условий первого рода:

$$v_{ij}^n = 0, (x_i, y_j) \in \gamma_h \quad (10)$$

В случае однородных условий второго рода, используем более точную аппроксимацию (пример производной по переменной x):

$$\begin{aligned}\frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=0} &\approx \frac{-3v_{0j} + 4v_{1j} - v_{2j}}{2h_x}, (x_i, y_j) \in \omega_h \\ \frac{\partial v}{\partial x} \Big|_{x=L_x} &\approx \frac{v_{N-2j} - 4v_{N-1j} + 3v_{Nj}}{2h_x}, (x_i, y_j) \in \omega_h\end{aligned}\quad (11)$$

Разностная аппроксимация для периодических граничных условий выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned} v_{0j}^{n+1} &= v_{Nj}^{n+1} & , & \quad v_{1j}^{n+1} = v_{N+1j}^{n+1}, j = 0, 1, \dots, N \\ v_{i0}^{n+1} &= v_{iN}^{n+1} & , & \quad v_{i1}^{n+1} = v_{iN+1}^{n+1}, j = 0, 1, \dots, N \end{aligned} \quad (12)$$

3 Описание реализации

Решение задачи было реализовано на языке C++ с использованием библиотек MPI и OpenMP.

Узлы суперкомпьютера расположены в порядке прямоугольной сетки. Эта сетка накладывается на расчетную сетку, и каждый узел получает соответствующий участок. Если по какой-то из координат x, y расчетная сетка не делится нацело на количество узлов, то остаток отдается последнему узлу по данной координате. Это создает незначительный дисбаланс нагрузки.

Каждый узел хранит в памяти свой расчетный участок и дополнительный слой элементов толщиной 1, т.н. гало. Гало - пограничные элементы, рассчитывается соседними узлами и передается на текущий. Таким образом, у данного узла есть достаточно данных, чтобы рассчитать свою область на текущей итерации.

Для реализации циклических условий, расчетная область расширяется таким образом, чтобы можно было вычислить крайний элемент N . Далее этот элемент пересылается на противоположную сторону сетки и помещается в индекс 0. И, наоборот, первый элемент сетки пересылается, чтобы расположиться в $N + 1$ позиции. Т.к. крайнему узлу не требуется гало с той стороны, где сетка заканчивается, то гало ячейки используются для расширения сетки.

OpenMP был сразу же включен в программный код. В данной работе считаем, что запуск OpenMP в один поток - это запуск без OpenMP. За количество потоков отвечает отдельный параметр.

Программа запускается командой

```
mpirun -n X ./solution mpiN mpiM gridN gridM gridT xmax ymax ompNumThreads
```

Где:

- X - число MPI узлов
- $mpiN, mpiM$ - размер сетки MPI
- $gridN, gridM$ - размер вычислительной сетки
- $gridT$ - количество шагов по времени
- $xmax, ymax$ - ограничения по x, y
- $ompNumThreads$ - число потоков OpenMP

4 Экспериментальные результаты

HPC	Nodes	Grid	OMP	Wall time	Delta	Speedup	Efficiency
bluegene	128	8192	1	4.96e+00	8.24e-08	1.00e+00	1.00e+00
bluegene	128	8192	2	2.49e+00	8.24e-08	1.99e+00	9.94e-01
bluegene	128	8192	3	1.67e+00	8.24e-08	2.96e+00	9.87e-01
bluegene	128	16384	1	2.09e+01	2.06e-08	1.00e+00	1.00e+00
bluegene	128	16384	2	1.05e+01	2.06e-08	2.00e+00	9.98e-01
bluegene	128	16384	3	6.98e+00	2.06e-08	2.99e+00	9.98e-01
bluegene	128	32768	1	8.32e+01	5.15e-09	1.00e+00	1.00e+00
bluegene	128	32768	2	4.17e+01	5.15e-09	1.99e+00	9.97e-01
bluegene	128	32768	3	2.79e+01	5.15e-09	2.99e+00	9.95e-01
bluegene	256	8192	1	2.48e+00	8.24e-08	2.00e+00	9.98e-01
bluegene	256	8192	2	1.25e+00	8.24e-08	3.95e+00	9.88e-01
bluegene	256	8192	3	8.45e-01	8.24e-08	5.86e+00	9.77e-01
bluegene	256	16384	1	1.04e+01	2.06e-08	2.00e+00	9.99e-01
bluegene	256	16384	2	5.23e+00	2.06e-08	3.99e+00	9.97e-01
bluegene	256	16384	3	3.50e+00	2.06e-08	5.96e+00	9.94e-01
bluegene	256	32768	1	4.17e+01	5.15e-09	2.00e+00	9.98e-01
bluegene	256	32768	2	2.12e+01	5.15e-09	3.93e+00	9.83e-01
bluegene	256	32768	3	1.42e+01	5.15e-09	5.88e+00	9.80e-01
bluegene	512	8192	1	1.24e+00	8.24e-08	3.99e+00	9.96e-01
bluegene	512	8192	2	6.36e-01	8.24e-08	7.80e+00	9.75e-01
bluegene	512	8192	3	4.33e-01	8.24e-08	1.14e+01	9.54e-01
bluegene	512	16384	1	5.22e+00	2.06e-08	4.00e+00	1.00e+00
bluegene	512	16384	2	2.63e+00	2.06e-08	7.94e+00	9.93e-01
bluegene	512	16384	3	1.76e+00	2.06e-08	1.19e+01	9.88e-01
bluegene	512	32768	1	2.08e+01	5.15e-09	3.99e+00	9.98e-01
bluegene	512	32768	2	1.05e+01	5.15e-09	7.92e+00	9.90e-01
bluegene	512	32768	3	7.03e+00	5.15e-09	1.18e+01	9.87e-01

Таблица 1: Результаты запусков на Bluegene.

HPC	Nodes	Grid	OMP	Wall time	Delta	Speedup	Efficiency
polus	1	2048	1	8.797578	1.31902e-06	1.0	1.0
polus	1	4096	1	33.57414	3.295944e-07	1.0	1.0
polus	1	8192	1	79.26881	8.23785e-08	1.0	1.0
polus	10	2048	1	29.14442	1.31902e-06	0.301861488408	0.0301861488408
polus	10	4096	1	20.4802	3.295944e-07	1.63934629545	0.163934629545
polus	10	8192	1	61.29066	8.23785e-08	1.29332609569	0.129332609569
polus	20	2048	1	14.50379	1.31902e-06	0.606570972139	0.030328548607
polus	20	4096	1	18.49763	3.295944e-07	1.81505090112	0.0907525450558
polus	20	8192	1	51.10186	8.23785e-08	1.5511922658	0.07755961329
polus	40	2048	1	30.35062	1.31902e-06	0.289864852843	0.00724662132108
polus	40	4096	1	29.18828	3.295944e-07	1.15026099517	0.0287565248792
polus	40	8192	1	50.30223	8.23785e-08	1.57585081218	0.0393962703045

Таблица 2: Результаты запусков на Polus